

## 行政院國家科學委員會專題研究計畫 期中進度報告

### 尋找新的星際分子以及探討太空中的化學反應(1/2)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC92-2112-M-032-012-

執行期間：92 年 08 月 01 日至 93 年 11 月 30 日

執行單位：淡江大學物理系

計畫主持人：秦一男

計畫參與人員：秦一男、施政行、江羽婷、黃姿雁

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 93 年 6 月 28 日

# 行政院國家科學委員會補助專題研究計畫期中報告

## 尋找新的星際分子以及探討太空中的化學反應

Search for New Interstellar Molecules

– Investigation of Chemical Processes in Space

計畫類別： 個別型計畫      整合型計畫

計畫編號：NSC - 92 - 2112 - M - 032 - 012

執行期間：92 年 08 月 01 日至 93 年 11 月 30 日

計畫主持人：秦一男      einmann@astro.phys.tku.edu.tw

計畫參與人員：施政行、江羽婷、黃姿雁

本成果報告包括以下應繳交之附件：

赴國外出差或研習心得報告一份

赴大陸地區出差或研習心得報告一份

出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份

國際合作研究計畫國外研究報告書一份

執行單位：淡江大學物理系

中 華 民 國 九 十 三 年 六 月 二 十 八 日

# 尋找新的星際分子以及探討太空中的化學反應

## Search for New Interstellar Molecules

### – Investigation of Chemical Processes in Space

計畫編號：NSC-92-2112-M-032-012

執行期限：92 年 8 月 1 日至 93 年 11 月 30 日

主持人：秦一男 淡江大學物理系 einmann@astro.phys.tku.edu.tw

計畫參與人員：施政行、江羽婷、黃姿雁 淡江大學物理系

#### 一、中文摘要

在天文學家不斷的發現新的星際有機分子後，不得不嘗試解釋：各式各樣不飽和有機分子究竟是如何在星際空間形成的。早期對星際分子雲的研究及化學反應模型多認為，離子與分子間的碰撞 (ion-molecule encounter) 以及解離、再複合等反應，是合成類似於  $\text{HC}_3\text{N}$  長鏈氰化物分子的主要途徑；但是透過實驗室的研究以及天文學家在觀測上的驗證，在理論上這樣的反應途徑所能提供的分子數量，要比天文學家觀測所得的少了兩個數量級。因此，近來有人建議，氰基 (cyanogen radical)  $\text{CN}$  與乙炔 (acetylene)  $\text{C}_2\text{H}_2$  兩中性分子間的反應才是合成  $\text{HC}_3\text{N}$  分子的主要途徑。為此，本計劃的第一步選擇尋找  $\text{CH}_3\text{CCH} + \text{CN}$  反應的兩個產物作為研究對象： $\text{CH}_3\text{CCCN}$  與  $\text{H}_2\text{CCCH}(\text{CN})$ 。其中， $\text{CH}_3\text{CCCN}$  分子早在星際介質內被發現，但對  $\text{H}_2\text{CCCH}(\text{CN})$  的尋找卻付之闕如。實驗室的測量預測，若氰基與氫原子的取代反應是形成這類分子的主要途徑，兩者在星際間的含量應相當。

除了長鏈分子外，多環芳香烴 (polycyclic aromatic hydrocarbons; PAHs) 一直是令天文學家感到好奇，確也十分頭痛的化合物，因為我們對它的形成所知有限；不過，一般相信，苯分子 (benzene)  $\text{C}_6\text{H}_6$  應該在這些反應當中扮演相當重要的媒介。苯在天文上的重要性雖然十分清楚，但因為苯分子不具有電偶極矩 (dipole moment)，使得電波天文學家無法直接觀測它。為了能進一步了解這一個重要的有機分子在星際介質內的分布，我們希望能偵測到氰化苯 (benzonitrile)  $\text{C}_6\text{H}_5\text{CN}$ 。首先，它具有相當大的電偶極矩 (約 4.2 Debye)，這使得電波天文學家有機會直接觀測到它在氣態時的分布。而且，就如同前段內所述，有苯分子及氰基分布的地方，氰化苯的形成應該是十分自然的，尤其是  $\text{C}_6\text{H}_6 + \text{CN}$  為放熱反應，這使該反應即便在低溫的星際空間也能產生。

除此之外，這些含氮的有機分子一旦在星際空間中形成後，便十分迅速的附著於星際塵埃的表面上，還可能更進一步與其他星際塵埃結合成類似於彗核的冰狀物質；對早期的地球而言，這正是前生物演化當中 – 無論是醣類或是氨基酸 – 非常重要的原料。

**關鍵詞：**星際介質、分子雲、有機分子、電波天文學

#### Abstract

Since the first detection of  $\text{HC}_3\text{N}$  and other unsaturated nitriles, there is a debate if these molecules are formed in ion-molecule encounters or neutral-neutral reactions. Theoretically, the predicted number density by only ion-molecule reactions is two orders of magnitude less than the observational results. We thus intend to investigate the synthetic route to form these molecules in the interstellar medium (ISM) – a backbone system to the interstellar carbon-hydrogen-nitrogen chemistry as verified in laboratory experiments and observations. Recently we demonstrated that the reaction of  $\text{CN}$  radicals with  $\text{CH}_3\text{CCH}$  forms two isomers  $\text{CH}_3\text{CCCN}$  and  $\text{H}_2\text{CCCH}(\text{CN})$  with similar abundances, however, only  $\text{CH}_3\text{CCCN}$  was identified in the ISM. An explicit identification and quantification of  $\text{H}_2\text{CCCH}(\text{CN})$  will elucidate the role of neutral-neutral reactions in the formation of nitriles in the ISM – a crucial mystery unresolved for the last 40 years.

Furthermore, Ever since the very first postulation of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), the formation routes of PAH like species in the interstellar medium (ISM) has been a challenge for astronomers and astrochemists. However, the search for interstellar benzene as the very first “building” block of PAHs presents a particular problem. Pioneering crossed molecular beam experiments with unsaturated hydrocarbons and our previous experiment of searching for  $\text{H}_2\text{CCCH}(\text{CN})$  showed that the exchange of a hydrogen atom in the hydrocarbon versus a cyanogen radical,  $\text{CN}$ , is common in all these processes. The benzonitrile molecule,  $\text{C}_6\text{H}_5\text{CN}$ , represents therefore an ideal microwave tracer for interstellar benzene. Also, benzonitrile is important from the astrobiological viewpoint: this molecule is thought to be the key species to a prebiotic synthesis of amino acids on young Earth upon aminolyses and hydrolyses. We thus intend to search for  $\text{C}_6\text{H}_5\text{CN}$  in different environments of the ISM: TMC-1 (cold), Orion-KL (hot), and CRL 618 (planetary nebula).

**Keywords:** Interstellar Medium; Molecular Clouds; Organic Compounds; Radio Astronomy

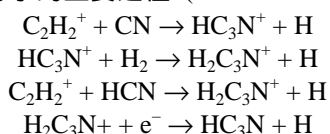
#### 二、計畫緣由與目的

自從  $\text{HCCCN}$  ( $X^1\Sigma^+$ ) 分子 (cyanoacetylene) 在

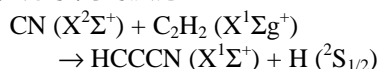
星際間被發現以來，天文學家就不斷的面臨一個問題：與其類似的各式各樣不飽和有機分子究竟是如何在星際空間形成的。其中包含如  $H-(C\equiv C)_n-CN$  ( $n = 1 \sim 5$ ; cyanopolyynes)以及  $CH_3-(C\equiv C)_n-CN$  ( $n = 1 \sim 2$ ; methyl- cyanopolyynes)等長鏈分子。這些高度不飽和的有機氰化物可以讓天文學家有機會了解，在星際空間中各種分子的形成過程，主要是藉由中性分子間的反應(neutral-neutral reaction)，抑或是離子與分子間的碰撞(ion-molecule encounter)。這是個已經困擾天文物理學家近四十年的問題 (Cherchneff & Glassgold 1993)。

除此之外，這些含氮的有機分子一旦在星際空間中形成後，便十分迅速的附著於星際塵埃的表面上，還可能更進一步與其他星際塵埃結合成類似於彗核的冰狀物質；對早期的地球而言，這正是前生物演化當中 – 無論是醣類或是氨基酸 – 非常重要的原料。甚至這些長鏈氰化物還可能在早期地球大氣的無氧環境下，扮演今天富氧大氣中臭氧的角色，使地球在四十五億年前沒有臭氧的保護下免於大量的紫外線照射，讓這些與生命起源息息相關的化學分子得以存活。今天地球上的環境已經與四十五億年前大相逕庭，但在土星(Saturn)的衛星泰坦(Titan)上，我們竟然發現  $HC_3N$  的存在；或許，這正讓天文學家有機會再度經歷，在地球上初期生命是如何誕生及演化的。

早期對星際分子雲的研究及化學反應模型多認為，離子與分子間的碰撞(ion-molecule encounter)以及解離、再複合等反應，是合成類似於  $HC_3N$  長鏈氰化物分子的主要途徑 (Howe & Millar 1990)：

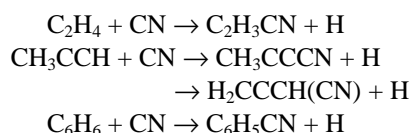


但是透過實驗室的研究以及天文學家在觀測上的驗證，在理論上這樣的反應途徑所能提供的分子數量，要比天文學家觀測所得的少了兩個數量級 (Howe & Millar 1990)。因此，近來有人建議，氰基(cyanogen radical)  $CN$  ( $X^2\Sigma^+$ )與乙炔(acetylene)  $C_2H_2$  ( $X^1\Sigma_g^+$ )兩中性分子間的反應：



才是合成  $HC_3N$  分子的主要途徑。這樣的反應可以發生於碳星(carbon star; 如 IRC+10216)外圍拱星氣體殼層(circumstellar envelope)上的噴發處 (Cherchneff & Glassgold 1993; Cherchneff et al. 1993; Millar & Herbst 1994; Doty & Leung 1998)；或是高溫的星際介質中 (Millar et al. 1997; Ruffle et al. 1997)；或是類似於 TMC-1 的黑暗星雲內 (des Forets et al. 1991; Suzuki et al. 1992; Herbst et al. 1994)。

近幾年來化學實驗上的改革與進步，尤其是藉由分子束交叉碰撞的實驗，讓我們有機會得以在實驗室內驗證，氰基與乙炔分子間的反應因為沒有庫倫障礙，的確是合成  $HC_3N$  的主要過程 (Huang et al. 1999b)。進一步的實驗更發現，氰基  $CN$  分子與其他中性有機分子上的氫原子是十分容易發生取代反應的；例如下列的各項反應 (Huang et al. 1999a; Balucani et al. 1999a; Balucani et al. 1999b)：



值得注意的是，上述反應的產物當中，氰基乙炔(cyanoacetylene)  $HC_3N$ 、氰基乙烯(vinylcyanide)  $C_2H_3CN$  以及甲基氰基乙炔(methyl cyanoacetylene)  $CH_3CCCN$  三者都已經被證實存在於星際介質當中。既然  $CN$  十分容易取代其他中性分子上的氫原子，上述的其他產物 – 氰基丙二烯(cyanoallene)  $H_2CCCH(CN)$ 與氰化苯(benzonitrile)  $C_6H_5CN$  – 就應當亦存在於星際氣體當中。前者的同分異構物  $CH_3CCCN$  已經被發現 (Brotten et al. 1984)；而我們相信後者的存在，不但因為苯( $C_6H_6$ )是生物化學中最重要的分子之一，更因為最新的紅外波段觀測以精確確認了苯分子的存在。

本計劃希望能探討高度不飽和有機氰化物的形成機制，尤其是再度確認氰基分子與氫原子的取代反應是否為這類分子的主要來源。我們希望藉由尋找  $H_2CCCH(CN)$ 與  $C_6H_5CN$  分子來達成我們的目標：

## 2.1 尋找 氰基 丙 二 烯 (cyanoallene) – $H_2CCCH(CN)$

在前面所提到的一系列反應當中， $CH_3CCH + CN$  的反應最適合用來達成此一目的；這是因為這個反應因為  $CH_3CCH$  分子上被取代的氫原子位置的不同，可以產生兩種同分異構物：甲基氰基乙炔(methylcyanoacetylene)  $CH_3CCCN$  與 氰基 丙 二 烯 (cyanoallene)  $H_2CCCH(CN)$ 。交叉分子束的實驗發現， $CH_3CCH + CN$  反應的產物當中，兩者的數量比相當，而且與粒子入射時的動能無關；這相當於在星際介質中約 10 K 至 4000 K 的溫度範圍。換句話說，如果實驗上的結果足以信賴而且前述關於中性分子間的反應(neutral-neutral reaction)的推論亦成立，則  $CH_3CCCN$  與  $H_2CCCH(CN)$  兩分子在星際空間的含量比應該接近於一，而且和環境溫度無關。目前為止， $CH_3CCCN$  已經在不同的環境溫度下都曾被觀測到，包括低溫的黑暗星雲如 TMC-1，以及高溫的恆星誕生區 Orion-KL。反觀  $H_2CCCH(CN)$  的觀測卻付之闕如。因此，我們希望利用第一年的時間在已經確認有  $CH_3CCCN$  分子存在的天體 (TMC-1 及 Orion-KL) 中尋找  $H_2CCCH(CN)$  的蹤跡。

## 2.2 尋找 氰化苯(benzonitrile) – $C_6H_5CN$

多環芳香烴(polycyclic aromatic hydrocarbons; PAHs)一直是令天文學家感到好奇，確也十分頭痛的化合物。這類化合物的大小介於小型有機分子與大型的含碳聚合體之間，佔星際介質內碳總含量的相當一部分比例，而且也是造成紅外線波段內部份未被確認譜線的主要來源。雖然如此，我們對它的形成卻所知有限；不過，一般都相信，苯分子(benzene)  $C_6H_6$  應該在這些反應當中扮演相當重要的媒介 (Allain et al. 1997; Brenner & Barker 1992; Cherchneff & Barker 1992; Frenklach & Feigelson 1989)。

苯在天文上的重要性雖然十分清楚，但是，因為苯分子不具有電偶極矩(dipole moment)，使得電波天文學家無法直接觀測它。它的電子能階躍遷則落在紫外線波段；但因為紫外線在星際介質中十分容易被散射，尤其是在可能含有苯的緻密分子雲內。就在最近，透過太空紅外望遠鏡(Infrared Space Observatory; ISO)的協助，讓天文學家終於在原始行星狀星雲(proto planetary nebula) CRL 618 內發現了睽違已久的苯分子(Cernicharo *et al.* 2001)。

為了能進一步了解這一個重要的有機分子在星際介質內的分布，我們希望能偵測到氰化苯(benzonitrile)  $C_6H_5CN$ 。首先，它具有相當大的電偶極矩(約 4.2 Debye)，這使得電波天文學家有機會直接觀測到它在氣態時的分布。而且，就如同「研究計畫之背景及目的」內的分析，有苯分子及氰基分布的地方，氰化苯的形成應該是十分自然的(Huang *et al.* 1999; Balucani *et al.* 1999a; Balucani *et al.* 1999b)，尤其是  $C_6H_6 + CN$  為放熱反應，這使該反應即便在低溫的星際空間也能產生。

除此以外，從天文生物學的觀點來看，氰化苯的存在更有其重要性，在早期地球上它更可能提供了氨基酸或鹽基等其它重要有機化合物的材料來源。

### 三、結果與討論

為了達到本計劃的預期成果，我們因此選定兩座大型的分米波望遠鏡來執行此一計劃：

1. 德國馬克斯 普朗克電波天文研究所(Max-Planck-Institut für Radioastronomie; MPIfR)的 100m 望遠鏡，位於德國西部的 Effelsberg (波昂附近)；
2. 澳洲國立天文台(Australian Telescope National Facility; ATNF)的 64m Parkes 望遠鏡，位於澳洲新南威爾斯州。

這兩座望遠鏡的口徑都達到 100 公尺的數量級，並且指向天空中的任何一個方向進行觀測。為了尋找可能含量極低的  $H_2CCCH(CN)$  與  $C_6H_5CN$  分子，只有透過這樣大型且靈敏的望遠鏡才有可能達到本計劃的目標。

為配合國外天文台及國內寒暑假時間，目前已完成採購數據分析所需之工作站及相關周邊設備，而觀測時間已安排於本年度七月至九月。其中七月中至八月初將至澳洲觀測，以本銀河系中心為觀測目標，充分利用南半球的優勢。八月中至九月初則為德國 Effelsberg 望遠鏡的觀測時間，目標則包含 TMC-1 及 Orion-KL。

### 五、參考文獻

Allain, T., Sedlmayr, E. & Leach, S. 1997, *Astron. & Astrophys.* **323**, 163  
 Balucani, N., Asvany, O., Chang, A.H.H., Lin, S.H., Lee, Y.T., Kaiser, R.I., Bettinger, H.F., Schleyer, P.v.R., & Schaefer III, H.F. 1999a, *J. Chem. Phys.* **111**, 7457  
 Balucani, N., Asvany, O., Chang, A.H.H., Lin, S.H., Lee, Y.T., Kaiser, R.I., Bettinger, H.F., Schleyer,

P.v.R., & Schaefer III, H.F. 1999b, *J. Chem. Phys.* **111**, 7472  
 Brenner, J.D. & Barker, J.R. 1992, *Astrophys. J. Lett.* **388**, L39  
 Broten, N.W., MacLeod, J.M., Avery, L.W., Irvine W.M., Höglund, B., Friberg, P. & Hjalmarsen, Å. 1984, *Astrophys. J. Lett.* **276**, L25  
 Cernicharo, J., Heras, A.M., Tielens, A.G.G.M., Pardo, J.R., Herpin, F., Guélin, M. & Waters, L.B.F.M. 2001, *Astrophys. J. Lett.* **546**, L123  
 Cherchneff, I. & Barker, J.R. 1992, *Astrophys. J.* **394**, 703  
 Cherchneff, I. & Glassgold, A.E. 1993, *Astrophys. J. Lett.* **419**, L41  
 Cherchneff, I., Glassgold, A.E. & Mamon, G.A. 1993, *Astrophys. J.* **410**, 188  
 des Forets, G.P., Flower, D.R. & Herbst, E. 1991, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **253**, 359  
 Doty, S.D. & Leung C.M. 1998, *Astrophys. J.* **502**, 898  
 Frenklach, M. & Feigelson, E.D. 1989, *Astrophys. J.* **341**, 372  
 Herbst, E., Lee, H.H., Howe, D.A., & Millar, T.J. 1994, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **268**, 335  
 Howe, D.A. & Millar, T.J. 1990, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **244**, 444  
 Huang, L.C.L., Balucani, N., Lee, Y.T., Kaiser, R.I., & Osamura, Y. 1999a, *J. Chem. Phys.* **111**, 2857  
 Huang, L.C.L., Lee, Y.T., & Kaiser, R.I. 1999b, *J. Chem. Phys.* **110**, 7119  
 Millar, T.J. & Herbst, E. 1994, *Astron. & Astrophys.* **288**, 561  
 Millar, T.J., Macdonald, G.H., & Gibb, A.G. 1997, *Astron. & Astrophys.* **325**, 1163  
 Ruffle D.P., Hartquist, T.W., Taylor, S.D., & Williams, D.A. 1997, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **291**, 235  
 Suzuki, H., Yamamoto, S., Ohishi, M., Kaifu, N., Ishikawa, S., Hirahara, Y., & Takano, S. 1992, *Astrophys. J.* **392**, 551